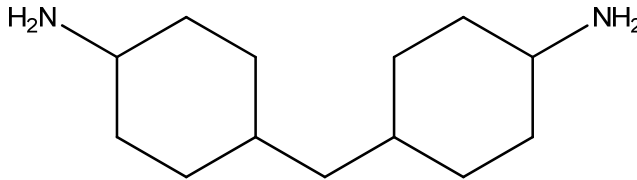


[1] ビス(4-アミノシクロヘキシル)メタン

1. 物質に関する基本的事項

(1) 分子式・分子量・構造式

物質名： ビス(4-アミノシクロヘキシル)メタン
(別の呼称：4,4'-ジアミノジシクロヘキシルメタン)
CAS 番号：1761-71-3
化審法官報公示整理番号：3-2272、4-101 (ジアミノジシクロヘキシルメタン)
化管法政令番号：
RTECS 番号：GX1530000
分子式：C₁₃H₂₆N₂
分子量：210.36
換算係数：1 ppm = 8.60 mg/m³ (気体、25°C)
構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は、常温常圧で固体である³⁾。

融点	38°C (凝固点) ³⁾ 、47~53°C ³⁾
沸点	320°C (760 mmHg) ²⁾ 、320°C (760 mmHg) ³⁾ 、 329.76°C (760 mmHg) ³⁾ 、327.9°C (760 mmHg) ³⁾
密度	0.98 (20°C) ³⁾ 、0.964 (20°C) ³⁾
蒸気圧	4.1×10 ⁻⁴ mmHg (=0.055 Pa) (20°C) ³⁾
分配係数(1-オクタノール/水) (log Kow)	2.03 (25°C) ¹⁾ 、2.2 (23°C、pH=11) ³⁾
解離定数(pKa)	pKa ₁ = 10.2 (20°C) ³⁾ 、pKa ₂ = 11.1 (20°C) ³⁾
水溶性(水溶解度)	1.23×10 ⁻⁴ mg/L (20°C、pH=11.6) ³⁾ 、3.98×10 ⁻³ mg/L (20°C、pH=11.8) ³⁾

(3) 環境運命に関する基礎的事項

本物質の分解性及び濃縮性は次のとおりである。

生物分解性
好氣的分解
分解率：<10% (28日)¹⁾

化学分解性
OH ラジカルとの反応性 (大気中)
反応速度定数：120×10⁻¹² cm³/(分子・sec) (AOPWIN⁷⁾ により計算)
半減期：0.54~5.4 時間 (OH ラジカル濃度を 3×10⁶~3×10⁵ 分子/cm³⁸⁾ と仮定して
計算)

加水分解性

大部分の脂肪族アミンは、安定と考えられる¹⁾

生物濃縮性

生物濃縮係数(BCF) : 66 (BCFBAF⁹⁾ により計算)

土壌吸着性

土壌吸着定数(Koc) : 450 (KOCWIN¹⁰⁾ により計算)

(4) 製造輸入量及び用途

① 生産量・輸入量等

本物質の化審法に基づき公表された一般化学物質としての製造・輸入数量の推移を表 1.1 に示す¹¹⁾。

表 1.1 製造・輸入数量の推移

平成(年度)	22	23	24	25	26
製造・輸入数量(t) ^{a)}	X ^{b)}	X ^{b)}	X ^{b)}	X ^{b)}	1,000 未満

注 : a) 製造数量は出荷量を意味し、同一事業者内での自家消費分を含んでいない値を示す。

b) 届出事業者が 2 社以下のため、製造・輸入数量は公表されていない。

本物質は、メチレンビス(4,1-シクロヘキシレン)=ジイソシアネート(CAS 番号 5124-30-1)の加水分解により生成する¹²⁾。

② 用途

本物質の主な用途は、メチレンビス(4,1-シクロヘキシレン)=ジイソシアネートの原料であるほか、染料、ポリアミド、繊維、ポリウレタン、エポキシ樹脂である¹⁾。

(5) 環境施策上の位置付け

特になし。

2. 曝露評価

生態リスクの初期評価のため、水生生物の生存・生育を確保する観点から、実測データをもとに基本的には水生生物の生息が可能な環境を保持すべき公共用水域における化学物質の曝露を評価することとし、データの信頼性を確認した上で安全側に立った評価の観点から原則として最大濃度により評価を行っている。

(1) 環境中への排出量

本物質は化学物質排出把握管理促進法（化管法）第一種指定化学物質ではないため、排出量及び移動量は得られなかった。

(2) 媒体別分配割合の予測

化管法に基づく排出量及び下水道への移動量が得られなかったため、Mackay-Type Level III Fugacity Model¹⁾により媒体別分配割合の予測を行った。予測結果を表 2.1 に示す。

表 2.1 Level III Fugacity Model による媒体別分配割合 (%)

排出媒体	大気	水域	土壌	大気/水域/土壌
排出速度 (kg/時間)	1,000	1,000	1,000	1,000 (各々)
大 気	0.0	0.0	0.0	0.0
水 域	2.5	96.4	2.2	3.8
土 壌	97.4	0.3	97.7	96.1
底 質	0.1	3.2	0.1	0.1

注：数値は環境中で各媒体別に最終的に分配される割合を質量比として示したもの。

(3) 各媒体中の存在量の概要

本物質の環境中等の濃度について情報の整理を行った。媒体ごとにデータの信頼性が確認された調査例のうち、より広範囲の地域で調査が実施されたものを抽出した結果を表 2.2 に示す。

表 2.2 各媒体中の存在状況

媒 体	幾何 平均値 ^{a)}	算術 平均値	最小値	最大値 ^{a)}	検出 下限値	検出率	調査地域	測定年度	文 献
公共用水域・淡水 μg/L	<0.014	<0.014	<0.014	<0.014	0.014	0/11	全国	2015	2)
公共用水域・海水 μg/L	<0.014	<0.014	<0.014	<0.014	0.014	0/5	全国	2015	2)
底質(公共用水域・淡水) μg/g									
底質(公共用水域・海水) μg/g									
魚類(公共用水域・淡水) μg/g									

媒体	幾何 平均値 ^{a)}	算術 平均値	最小値	最大値 ^{a)}	検出 下限値	検出率	調査地域	測定年度	文献
魚類(公共用水域・海水) µg/g									

注：a) 最大値または幾何平均値の欄の**太字**で示した数字は、曝露の推定に用いた値を示す。

(4) 水生生物に対する曝露の推定（水質に係る予測環境中濃度：PEC）

本物質の水生生物に対する曝露の推定の観点から、水質中濃度を表 2.3 のように整理した。水質について安全側の評価値として予測環境中濃度（PEC）を設定すると、公共用水域の淡水域、同海水域ともに **0.014 µg/L** 未満程度となった。

表 2.3 公共用水域濃度

水域	平均	最大値
淡水	0.014 µg/L 未満程度 (2015)	0.014 µg/L 未満程度 (2015)
海水	0.014 µg/L 未満程度 (2015)	0.014 µg/L 未満程度 (2015)

注：1) 環境中濃度での（ ）内の数値は測定年度を示す。

2) 公共用水域・淡水は、河川河口域を含む。

3. 生態リスクの初期評価

水生生物の生態リスクに関する初期評価を行った。

(1) 水生生物に対する毒性値の概要

本物質の水生生物に対する毒性値に関する知見を収集し、生物群（藻類、甲殻類、魚類及びその他の生物）ごとに整理すると、表 3.1 のとおりとなった。

表 3.1 水生生物に対する毒性値の概要

生物群	急性	慢性	毒性値 [μg/L]	生物名	生物分類/和名	エンドポイント /影響内容	曝露 期間[日]	試験の 信頼性	採用の 可能性	文献 No.
藻類			952,000*1	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	緑藻類	EC ₁₀ GRO (RATE)	3	B	—	2)-1 3)-1
	○		2,164,000 *1	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO (RATE)	3	B	B	2)-1 3)-1
甲殻類	○		6,840	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	B	B	2)-2 3)-3
	○		7,070	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	B	B	2)-3 3)-2
	○		9,240	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	B	B	2)-4 3)-4
魚類	○		>100,000 *1*2	<i>Leuciscus idus</i>	コイ科	LC ₅₀ MOR	4	B	B	2)-5 3)-5
	○		240,000	<i>Leuciscus idus</i>	コイ科	LC ₅₀ MOR	4	D	C	1)-547
その他			—	—	—	—	—	—	—	—

急性/慢性：○印は該当する毒性値

毒性値 (太字)：採用可能な知見として本文で言及したもの

毒性値 (太字下線)：PNEC 導出の根拠として採用されたもの

試験の信頼性：本初期評価における信頼性ランク

A：試験は信頼できる、B：試験は条件付きで信頼できる、C：試験の信頼性は低い、D：信頼性の判定不可

E：信頼性は低くないと考えられるが、原著にあたって確認したものではない

採用の可能性：PNEC 導出への採用の可能性ランク

A：毒性値は採用できる、B：毒性値は条件付きで採用できる、C：毒性値は採用できない、

—：採用の可能性は判断しない

エンドポイント

EC₁₀ (10% Effective Concentration)：10%影響濃度、EC₅₀ (Median Effective Concentration)：半数影響濃度、

LC₅₀ (Median Lethal Concentration)：半数致死濃度

影響内容

GRO (Growth)：生長 (植物)、IMM (Immobilization)：遊泳阻害、MOR (Mortality)：死亡

毒性値の算出方法

RATE：生長速度より求める方法 (速度法)

*1 pH 調整した試験溶液を用いた試験結果

*2 限度試験 (毒性値を求めるのではなく、定められた濃度において影響の有無を調べる試験) から得られた値

評価の結果、採用可能とされた知見のうち、生物群ごとに急性毒性値及び慢性毒性値のそれぞれについて最も小さい毒性値を予測無影響濃度 (PNEC) 導出のために採用した。その知見の概要は以下のとおりである。

1) 藻類

ドイツ工業規格の試験方法 (DIN 38412, Part9) に準拠して、緑藻類 *Desmodesmus subspicatus* (旧名 *Scenedesmus subspicatus*) の生長阻害試験が実施された^{2)-1, 3)-1}。設定試験濃度は0 (対照区、助剤対照区)、250、500、1,000、2,000、4,000、8,000 mg/L (公比2) であった。速度法による72時間半数影響濃度 (EC₅₀) は、設定濃度に基づき 2,164,000 µg/L であった。

2) 甲殻類

OECDテストガイドラインNo.202に準拠して、オオミジンコ *Daphnia magna* の急性遊泳阻害試験が実施された^{2)-2, 3)-3}。試験は止水式で行われ、設定試験濃度は0 (対照区)、0.625、1.25、2.5、5、10、20 mg/L (公比2) であった。試験溶液調製の際、1.0 N HClを用いてストック溶液をpH7.19に調整した。試験用水には、硬度80~100 mg/Lの水道水が用いられた。遊泳阻害に関する48時間半数影響濃度 (EC₅₀) は、設定濃度に基づき 6,840 µg/L であった。

3) 魚類

ドイツ工業規格の試験方法 (DIN 38412, Part 15) に準拠して、コイ科 *Leuciscus idus* の急性毒性試験が実施された^{2)-5, 3)-5}。試験は止水式 (曝気あり) で行われ、設定試験濃度は0 (対照区)、100 mg/L (限度試験) であった。被験物質の曝露による死亡率は10%であり、96時間半数致死濃度 (LC₅₀) は、設定濃度に基づき 100,000 µg/L 超とされた。

(2) 予測無影響濃度 (PNEC) の設定

急性毒性及び慢性毒性のそれぞれについて、上記本文で示した毒性値に情報量に応じたアセスメント係数を適用し予測無影響濃度 (PNEC) を求めた。

急性毒性値

藻類	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	72時間 EC ₅₀ (生長阻害)	2,164,000 µg/L
甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	48時間 EC ₅₀ (遊泳阻害)	6,840 µg/L
魚類	<i>Leuciscus idus</i>	96時間 LC ₅₀	100,000 µg/L 超

アセスメント係数：100 [3 生物群 (藻類、甲殻類及び魚類) について信頼できる知見が得られたため]

これらの毒性値のうち、最も小さい値 (甲殻類の 6,840 µg/L) をアセスメント係数 100 で除することにより、急性毒性値に基づく PNEC 値 68 µg/L が得られた。

慢性毒性値については、信頼できる知見が得られなかったため、本物質の PNEC としては甲殻類の急性毒性値から得られた 68 µg/L を採用する。

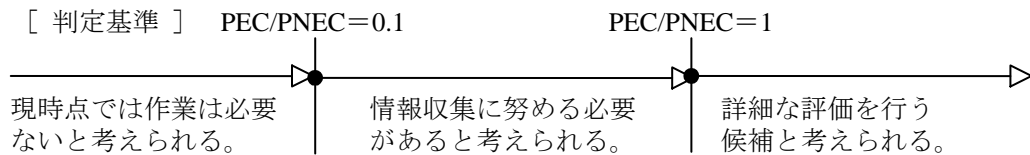
(3) 生態リスクの初期評価結果

表 3.2 生態リスクの初期評価結果

水 質	平均濃度	最大濃度(PEC)	PNEC	PEC/ PNEC 比
公共用水域・淡水	0.014 µg/L 未満程度 (2015)	0.014 µg/L 未満程度 (2015)	68 µg/L	<0.0002
公共用水域・海水	0.014 µg/L 未満程度 (2015)	0.014 µg/L 未満程度 (2015)		<0.0002

注：1) 水質中濃度の () 内の数値は測定年度を示す

2) 公共用水域・淡水は、河川河口域を含む



本物質の公共用水域における濃度は、平均濃度で見ると淡水域、海水域ともに 0.014 µg/L 未満程度であった。安全側の評価値として設定された予測環境中濃度 (PEC) も、淡水域、海水域ともに 0.014 µg/L 未満程度であった。

予測環境中濃度 (PEC) と予測無影響濃度 (PNEC) の比は、淡水域、海水域ともに 0.0002 未満であり、本物質について現時点では作業の必要はないと考えられる。

4. 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) OECD High Production Volume Chemicals Program(2016) : SIDS (Screening Information Data Set) Initial Assessment Report, C1-13 Primary Amines.
- 2) Lide, D.R. ed. (2012): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2012), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).
- 3) European Chemicals Agency : Information on Registered Substances, 4,4'-methylenebis(cyclohexylamine).
(<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>, 2016.6.3 現在).
- 4) U.S. Environmental Protection Agency, MPBVPWIN™ v.1.43.
- 5) U.S. Environmental Protection Agency, KOWWIN™ v.1.68.
- 6) U.S. Environmental Protection Agency, WSKOWWIN™ v.1.42.
- 7) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v.1.92.
- 8) Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., and Michalenko, E.M. ed. (1991): Handbook of Environmental Degradation Rates, Boca Raton, London, New York, Washington DC, Lewis Publishers: xiv.
- 9) U.S. Environmental Protection Agency, BCFBAF™ v.3.00.
- 10) U.S. Environmental Protection Agency, KOCWIN™ v.2.00.
- 11) 経済産業省 : 化学物質の製造輸入数量
(http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/volume_index.html, 2016.05.12 現在).
- 12) OECD High Production Volume Chemicals Program(2005) : SIDS (Screening Information Data Set) Initial Assessment Report, 4,4'-Methylenedicyclohexyl diisocyanate.

(2) 曝露評価

- 1) U.S. Environmental Protection Agency, EPI Suite™ v.4.00.
- 2) 環境省環境保健部環境安全課 (2016) : 平成 27 年度化学物質環境実態調査.

(3) 生態リスクの初期評価

- 1) U.S.EPA 「ECOTOX」
547 : Juhnke, I., and D. Luedemann (1978): Results of the Investigation of 200 Chemical Compounds for Acute Fish Toxicity with the Golden Orfe Test (Ergebnisse der Untersuchung von 200 Chemischen Verbindungen auf Akute Fischtoxizität mit dem Goldorfeentest). Z.Wasser-Abwasser-Forsch. 11(5):161-164.
- 2) OECD High Production Volume Chemicals Program (2011): SIDS (Screening Information Data Set) Initial Assessment Report, Primary Amines.

1. BASF AG (1990): Final report on algae toxicity study: 4,4'-diaminodicyclohexylmethane, Unpublished Study. Study No. 29-BASF-Oekolimna-05/90/198, report of OEKOLIMNA - Gesellschaft fuer Oekologie und Gewaesserkunde mbH, Aug 1990. Testing laboratory, BASF AG Department of Ecology.
 2. Air Products and Chemicals, Inc. (2002): Aquatic toxicological study on product PACM (pH unadjusted), (RRRS EXT-02/054).
 3. Air Products and Chemicals, Inc. (2002): Aquatic toxicological study on product PACM (pH adjusted), (RRRS EXT-02/055).
 4. BASF AG (1986). Unpublished study 1/0021/2/89-0021/89, Department of Toxicology, 1986-04-21.
 5. BASF AG (1988). Unpublished studies, 1/0177/2/88, Department of Ecology, Company Study No.: 1/0177/2/88-0177/88, 1988-04-21.
- 3) European Chemicals Agency : Information on Registered Substance, 4,4'-methylenebis (cyclohexylamine) .
(<https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>, 2016.6.3 現在)
1. Exp Key Toxicity to aquatic algae and cyanobacteria 002 (1990).
 2. Exp Key Short-term toxicity to aquatic invertebrates 001 (2002).
 3. Exp Key Short-term toxicity to aquatic invertebrates 002 (2002).
 4. Exp Key Short-term toxicity to aquatic invertebrates 003 (1989).
 5. Exp Key Short-term toxicity to fish 002 (1988).